Formule de Kubo:
Conductivité électrique

Système d'électrons libres dans un champ électromagnétique :

$$H(t) = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2m} \psi^\dagger \left(-i\vec{\nabla} - e\vec{A}(\vec{r},t) \right)^2 \psi - e\phi(\vec{r},t)\psi^\dagger\psi \right\}$$

$$= H_0 + \int d^3r \left\{ i\frac{e}{2m} \psi^\dagger \left(\vec{A}\vec{\nabla} + \vec{\nabla}\vec{A} \right) \psi + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \psi^\dagger \psi - e\phi\psi^\dagger\psi \right\}$$

Opérateur courant :

$$\vec{j} = -\frac{\delta H}{\delta \vec{A}} = -i\frac{e}{2m} \left[\psi^\dagger (\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^\dagger)\psi \right] - \frac{e^2}{m} \vec{A}\psi^\dagger\psi$$

$$= \vec{j}_{\mathrm{para}} + \vec{j}_{\mathrm{dia}}$$

dans la jauge de London (Coulomb) : $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Opérateur courant :

$$\vec{j}_{\mathrm{para}}(\vec{r},t) = -i\frac{e}{2m}\left\{\psi^\dagger(\vec{r},t)(\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)) - (\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r},t))\psi(\vec{r},t)\right\}$$

$\rightarrow$ transformée de Fourier : $\vec{j}_{\mathrm{para}}(\vec{q}) = \dfrac{e}{m}\displaystyle\int d^3p\, \vec{p}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2} a_{\vec{p}+\vec{q}/2}$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Réponse linéaire : $\delta H_{\mathrm{para}}(t) = -\int d^3r\, \vec{j}_{\mathrm{para}} \cdot \vec{A}$

Chapitre II.3.3 $\rightarrow$

$$\langle j_{\mathrm{para},\alpha}(\vec{r},t)\rangle = -\int dt' \int d^3r' \chi^{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}', t-t') A_\beta(\vec{r}', t')$$

avec $\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = -i\theta(t-t')\langle [j_{\mathrm{para},\alpha}(\vec{r},t), j_{\mathrm{para},\beta}(\vec{r}',t')]\rangle$

transformée de Fourier :

$$\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, t-t') = -i\theta(t-t')\langle [j_{\mathrm{para},\alpha}(\vec{q},t), j_{\mathrm{para},\beta}(-\vec{q},t')]\rangle$$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Conductivité : $\langle j_\alpha(\vec{q},\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) E_\beta(\vec{q},\omega)$

vs $\langle j_{\mathrm{para},\alpha}(\vec{q},\omega)\rangle = -\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) A_\beta(\vec{q},\omega)$

$$\langle j_\alpha(\vec{q},\omega)\rangle = -\left(\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) + \frac{ne^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\right) A_\beta(\vec{q},\omega)$$

avec

avec $\vec{E}(\vec{q},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{q},t) \Leftrightarrow \vec{E}(\vec{q},\omega) = i\omega\vec{A}(\vec{q},\omega)$,

on obtient

$$\boxed{\begin{aligned} \langle j_\alpha(\vec{q},\omega)\rangle &= -\frac{1}{i\omega}\left(\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m \to \omega + i\eta) + \frac{ne^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\right) E_\beta(\vec{q},\omega) \\ &\equiv \sigma_{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) E_\beta(\vec{q},\omega) \end{aligned}}$$